学校编码：10384　　　　　　　　　　分类号_______密级 ______

学　　号：X2007170006　　　　　　　UDC ____________________

厦门大学

硕　士　学　位　论　文

增广 Krylov 子空间上的矩阵问题的求解

Augmented Krylov Subspace For Solving Large Matrix Problems

马　奕

指导教师姓名：陈桂芝 教授
专　业 名 称：计 算 数 学

论文提交日期：2010 年 5 月
论文答辩日期：2010 年 6 月
学位授予日期：2010 年　月

答辩委员会主席：_________
评　　阅　　人：_____

2010 年 7 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（　　　　　　　　　　）课题（组）的研究成果，获得（　　　　　　　　　　）课题（组）经费或实验室的资助，在（　　　　　　　　　　）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

2010 年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（　　）1.经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于　年　　月　　日解密，解密后适用上述授权。

（　　）2.不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打″√″或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

摘　要

本文研究求解大规模矩阵问题的几个理论及算法，在Lanczos 算法的基础上提出了改进的算法．利用精化向量的优越性，用精化向量替代 Ritz 向量，在增广 Krylov 子空间上用精化Lanczos 方法求解对称矩阵问题及非对称矩阵问题，理论上分析它们与传统方法的差别及优劣性．

关键词：精化投影，Ritz 对，精化 Ritz 对，精化 Lanczos 方法， Krylov 子空间

Abstract

This thesis derives several theories and algorithms for solving large matrix problems on the basis of Lanczos method. The refined Ritz vectors take the place of the Ritz vectors when adding to the Krylov subspace. In the augmented Krylov subspace the refined Lanczos method is used to solving the symmetric systems and unsymmetric systems. Theoretical analysis shows the difference between the new methods and the old methods and show which one is better.

Key words: refined projection, Ritz pairs, refined Ritz pairs, refined Lanczos method, Lanczos with deflated restarting, Krylov subspace

目 录

Contents

第一章 前 言

1.1 问题的来源

在现代社会中，计算数学及大量科学工程的计算中，如计算流体力学、化学工程、量子物理、经济统计、结构工程等领域，许多的问题到最后都要解决大规模矩阵问题，它包括特征问题 $A\varphi_i=\lambda_i\varphi_i$ 和线性方程组 $Ax=b$ 的求解，其中 A 是 n 阶实（复）矩阵，$(\lambda_i,\varphi_i), i=1,2,\cdots,n$ 是 A 的特征对 $(\|\varphi_i\|=1)$．大规模矩阵问题是大规模科学与工程计算的基础和重要组成部分，其研究具有重要的理论意义和广泛的应用价值.

在实际问题中，对于离散化后得到的一些阶数为几千阶、几万阶乃至十几万阶的矩阵，往往需要的是矩阵的若干个特征值及其对应的特征向量，而它们往往是依实部最大或者最小、依虚部最大或者最小、依模最大或者最小. 对于矩阵特征问题在众多领域的广泛应用，矩阵特征问题数值求解的理论研究、算法和软件的开发是计算数学和科学与工程计算领域的重大课题.

1.2 投影方法

大规模矩阵问题的解决主要分为直接法和迭代法两大类，在求解小规模或者中规模的对称与非对称矩阵的问题时，常用直接法求解，如对矩阵的特征问题，最行之有效的方法是由 Francis 提出的 QR 方法[2]，该方法不仅在可靠性分析、数值稳定性研究等方面取得了大量的成功，并且编制成的软件——MATLAB 软件包中的计算矩阵全部特征对的函数子程序 eig.m 就是以该方法为原理编制成的. 还有一些其他有效的解决方法，因此这类矩阵问题已经得到基本的解决.

但是上面的方法由于在计算、存储等方面的限制，对于大规模矩阵的特征问题却变得无能为力. 主要表现在：随着所要解决矩阵阶数的增大，造成计算时间冗长和内存不足；同时对于矩阵的特征问题，在实际问题中，我们有时仅关心矩阵按实部最大（小）的少数几个特征对，如按照上面的方法将计算出它的全部特

征对，这将造成极大的浪费；并且在实际中的矩阵是稀疏且具有特殊结构，对此类矩阵进行任何变换将会引起非零元素灾难性的增加，致使算法无法进行下去。因此，去开发能利用矩阵的稀疏性并不改变原矩阵的新的数值方法显得非常重要，并有实际意义．目前，解决此类问题最常用的方法就是投影类方法．它的基本思想是将大规模矩阵向某低维子空间进行投影，把大规模问题化为中、小规模矩阵的特征问题的求解．投影方法可分为三类：

第一类是正交投影法．其基本思想是：给定某低维子空间 K，则大规模矩阵 A 在 K 上满足下列条件

$$\begin{cases} \tilde{\varphi}_i \in K, \\ \left(A-\tilde{\lambda}_i I\right)_i \tilde{\varphi}_i \perp K, \end{cases} \tag{1.1}$$

的 $\tilde{\lambda}_i,\tilde{\varphi}_i$ 并使用 $\left(\tilde{\lambda}_i,\tilde{\varphi}_i\right)$ $\left(\|\tilde{\varphi}_i\|=1\right)$ 作为 A 的特征对 $\left(\lambda_i,\varphi_i\right)$ 的近似，$\tilde{\lambda}_i,\tilde{\varphi}_i$ 分别称为 A 在子空间 K 上的 Ritz 值和 Ritz 向量[2]．对子空间 K 不同的选取将会导出不同的正交投影方法，目前比较经常使用的就有广义 Lanczos 方法，它是建立在 $K_m\left(A,\upsilon_1\right)$ 上所有正交投影方法的总称，如果 Krylov 子空间的基为标准正交基，则称此类方法为 Arnoldi 方法[2]，当 A 为对称矩阵时，Arnoldi 方法就是著名的 Lanczos 方法[5]．求解矩阵问题的 Krylov 子空间方法可以追溯到 50 年代初 Lanczos 和 Arnoldi 的工作，但是在其后 20 年，人们认为这类方法是数值不稳定的，很少用于实际计算．直到 70 年代初 Paige 在其著名的博士论文[9]中重新研究了 Lanczos 以及 80 年代初 Saad[13]重新研究了 Arnoldi 方法后，才使人们重新认识了这两个方法，之后，人们又做了大量的理论分析和数值实验，充分认识到 Krylov 子空间方法是求解大型矩阵问题的一类最有效的方法.

Krylov 子空间方法是求解大规模线性方程组的一类重要迭代法，主要包括完全正交方法（FOM）、广义极小残量法（GMRES）[14]、共轭梯度法（CG）[15]及 Lanczos 方法等，这些迭代法每一步只需进行少量矩阵向量的乘积，与直接法相比，具有收敛速度快、计算量小、存储量少等特点．求解线性方程组的投影方法就是寻找近似解，满足

$$\begin{cases} x_m \in x_0 + K, \\ b - Ax_m \perp L, \end{cases} \tag{1.2}$$

其中 K，L 是两个 m 维子空间，设 x_0 为任一初始向量，令 $r_0 = b - Ax_m$，若 K 取为

Krylov 子空间$K_m\left(A,r_0\right)$，则相应的投影方法为 Krylov 子空间方法[20]．在实际计算中，常用 Arnoldi 过程产生来产生 Krylov 子空间$K_m\left(A,r_0\right)$的一组标准正交基．当A为非对称矩阵时，取 $\mathrm{L}=K_m\left(A,r_0\right)$可得完全正交化方法，取$\mathrm{L}=AK_m\left(A,r_0\right)$可得广义极小残量法；当$A$为对称正定矩阵时，CG 及其预处理技术是求解方程组最有效的方法；当A为对称不定矩阵时，Lanczos 算法是求解大型对称不定线性方程组的有效方法之一．

由于用 Arnoldi 过程形成 Krylov 子空间的一组标准正交基时必须显式地将新产生的向量与已经产生的所有基向量正交，该方法还需要求一个m阶上 Hessenberg 阵的全部特征对．在实际使用时，内存和计算速度等条件的限制，Krylov 子空间的维数不能太大，因此，在 Krylov 子空间用投影方法求矩阵特征问题时一般须采取重新启动，所谓的重新启动，即固定子空间的维数m，如果在求解的特征问题没有收敛，则从已经计算的近似特征对中，以某种方式选择新的υ_1，用它形成新的m维 Krylov 子空间，再次用投影类方法求解矩阵特征问题，如此进行下去，直到算法收敛．重新启动的好坏，即υ_1的选择是投影类方法是否成功的最关键因素之一．理论分析表明[5]：在一个子空间中使用投影类方法求矩阵特征问题时，若该子空间中含有所求特征向量的信息越丰富，则它的收敛速度越快，这也是选择重新启动的原则之一．

第二类方法是调和投影方法，当矩阵特征值密集时，还可以采用调和投影方法，这也是最近研究的一个热点，它除了可以通过选取位移点改善原矩阵的特征值分布外，还可以将内部特征值问题化为端部特征值问题．其基本思想是：给定一个目标点τ，将(1.1)式中正交条件的子空间 K 改为$\left(A-\tau I\right)K$就是调和投影方法．调和投影方法是 Morgan 首先提出的，适合于计算内部特征值和对应的特征向量．此后相继提出了增广 Krylov 子空间上的调和 Arnoldi 方法等．调和投影方法实际上可以转化为一正交投影方法，因此，正交投影方法已有的性质在调和投影方法中也相应存在．

第三类方法是精化投影方法，理论分析和大量的数值实验表明了求解大规模矩阵特征问题的经典正交投影、斜投影方法都存在着 Ritz 值收敛而 Ritz 向量可能收敛得缓慢甚至于不收敛的隐患．为此，Jia 对经典的正交投影和斜投影方法进行了重大革新，用另一在求解子空间上满足最优条件的新向量称之为精化向量

[3]代替 Ritz 向量作为待求特征向量的近似，由此导出的精化投影方法不但克服了原有方法的隐患，使得算法的可靠性增强，而且收敛的速度也大大加快. 在文献[16]中，对一般的投影空间 K 建立了精化向量的先验估计式，由此说明精化向量收敛到对应的特征向量的充分条件和近似特征值 $\tilde{\lambda}_i$ 收敛到相应的特征值 λ_i 的充分条件是相同的. 从而，精化投影方法克服了传统的投影方法中可能出现的近似特征值收敛的条件下，相应的近似特征向量却可能收敛的非常缓慢甚至于发散的这一潜在隐患. 从理论上保证在近似特征值收敛的条件下，相应的精化向量也收敛，这大大增强了精化投影的可靠性. 进一步将精化策略和求解大规模矩阵问题的许多其它重要技术或方法相结合，研究和开发出更多更高效的新算法，是一个十分重要而且迫切需要解决的课题.

1.3 本文的工作

将一些经典投影方法中许多成功的思想，利用精化思想进行改进和开发得到更为有效的方法，这是本论文选题的动机，本文主要工作分为以下两个部分：

• 用精化 Lanczos 重启方法和精化 Lanczos 压缩重启求大规模对称矩阵问题的近似特征对和方程组的解，与传统的 Lanczos 方法不同的是：对确定的 Ritz 值 $\tilde{\lambda}_i$，用精化向量 u_i [3]替代传统 Ritz 向量 y_i 作为矩阵的近似特征向量，近似特征对 $\left(\tilde{\lambda}_i, u_i\right)$ 的残量范数达到最小，它是该子空间所能够提供的近似特征对的最佳逼近，这时在新的子空间中所含有的特征向量信息越丰富，其收敛速度可能很快. 在 Lanczos 压缩重启中的增广 Krylov 子空间上分别添加 Ritz 向量和精化向量，理论上分析它们与传统方法的差别及优劣性.

• 用精化 Lanczos 压缩重启求大规模非对称矩阵问题的近似特征对和方程组的解，再次利用精化向量的优越性，理论上比较了在增广 Krylov 子空间上分别添加 Ritz 向量和精化向量的差别.

文中 $K_m\left(A, \upsilon_1\right) = \text{span}\ \left\{\upsilon_1, A\upsilon_1, \cdots A^{m-1}\upsilon_1\right\}$ 表示 m 维的 Krylov 子空间，I 表示 n 阶单位矩阵，e_m 表示 m 阶单位矩阵 I_m 的第 m 列，文中所有范数均为 2-范数，上标“^{T}”表示转置.

第二章的结果已整理成文《增广 Krylov 子空间上的精化 Lanczos 方法》，已接收在《龙岩学院学报》上发表.

第二章 在增广Krylov子空间上用精化Lanczos方法求解对称矩阵问题

2.1 引言

传统的Arnoldi方法首先用Arnoldi过程产生Krylov子空间$K_m(A,\upsilon_1)$的一组标准正交基，在该子空间上得到矩阵A在这组标准正交基下的限制矩阵H_m，采用H_m的特征值来近似A的特征值，相应的Ritz向量来近似A的特征向量．当A是对称阵时，H_m是三对角阵，这时问题转化为三对角阵特征值的求解问题，而它的求解，复杂度大大减小，有很多成熟的办法，如分而治之法， QR法等，可以在并行机上达到$\mathrm{O}(\log n)$的量级．

对称Lanczos算法，在没有舍人误差的情形下，得到的标准正交基相互正交的并且至多n步必然终止．但是在出现舍入误差的情况下，计算得到的向量组将失去正交性．因此，长期以来被人们认为是不稳定的．直到1971年,Paige通过仔细的舍入误差分析，发现失去正交性恰与近似特征对的精度提高有关之后，经过大量的理论分析和数值实验．人们充分认识到Lanczos方法是求解大型稀疏对称矩阵特征值问题的最有效方法之一．目前，Lanczos方法是求大型稀疏对称矩阵部分极端特征值的最有效方法．

本文用精化Lanczos重启方法和精化Lanczos压缩重启求大规模矩阵的近似特征对,与传统的Lanczos方法不同的是:对确定的Ritz值$\tilde{\lambda}_i$,用精化向量u_i[3]替代传统Ritz向量y_i作为矩阵的近似特征向量，可以证明精化向量是无条件收敛的，比Ritz向量更为准确，并且近似特征对$(\tilde{\lambda}_i,u_i)$的残量范数达到最小，它是该子空间所能够提供的近似特征对的最佳逼近．在Lanczos压缩重启中的增广Krylov子空间上分别添加Ritz向量和精化向量，从理论上分析它们与传统方法的差别及优劣性．

2.2 Lanczos 方法及精化 Lanczos 方法

Lanczos方法是求解大规模稀疏对称矩阵端部特征问题的一种常用的正交投影方法，在 Krylov 子空间上对对称矩阵用 Rayleige-Ritz 方法，得到小规模特征问题的近似特征对．其基本思想是给定一初始向量，逐步地构造由该初始向量和对称矩阵生成的 Krylov 子空间的标准正交基．通过简单的三项递推公式将大规模对称矩阵投影为小规模对称三对角阵，接着用该三对角阵的特征对来得出原始矩阵的近似特征对．由于三对角阵好的结构和小的维数，在准确计算下，每一步所需要得存储量和计算量是常量，不会随着子空间维数的增加而改变[18].

Lanczos 过程写成矩阵形式为[15]：

$$\begin{aligned} &AV_m = V_m T_m + \beta_{m+1}\upsilon_{m+1}e_m{}^T = V_{m+1}\tilde{T}_m, \\ &V_m{}^T A V_m = T_m, \end{aligned} \tag{2.1}$$

其中V_m是$n\times m$矩阵，$V_m=(\upsilon_1,\cdots,\upsilon_m)$；$T_m$是对称三对角阵，即

$$T_m = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & & \beta_m & \alpha_m \end{bmatrix},$$

$\tilde{T}_m$是比T_m多出一行的矩阵$\tilde{T}_m = \begin{bmatrix} T_m \\ \beta_{m+1}e_m{}^T \end{bmatrix}$．由残量的定义容易得到[13]：

$$r_i = Ay_i - \theta_i y_i = \beta_{mi}\upsilon_{m+1}, \tag{2.2}$$

其中$\beta_{mi}=\beta_{m+1}e_m{}^T g_i$，且$\|r_i\|=|\beta_{mi}|$．下面给出 Lanczos 方法算法．

算法 1. Lanczos 方法[18]

1．开始：Krylov 子空间维数为m，l为所需特征对的个数，误差限r_{tol}和单位初始向量υ_1.

2．Lanczos 过程：完成m步 Lanczos 过程 ：定义$\beta_1=0,\upsilon_0=0$，对 $j=1,2,\cdots,m$ 做$\omega_j = A\upsilon_j - \beta_j\upsilon_{j-1}$， $\alpha_j=(\omega_j,\upsilon_j)$ ，$\omega_j=\omega_j-\alpha_j\upsilon_j$，$\beta_{j+1}=\|\omega_j\|_2$，如果$\beta_{j+1}=0$停止，$\upsilon_{j+1}=\omega_{j+1}/\beta_{j+1}$．形成对称三对角矩阵$T_m$，正交阵$V_m$.

3．求近似特征对：计算T_m的特征对$(\tilde{\lambda}_i,g_i)$，则$\tilde{\lambda}_i$为A的 Ritz 值，Ritz 向

量为 $y_i = V_m g_i$，每个 Ritz 对 $(\tilde{\lambda}_i, y_i)$ 的残量为 $r_i \equiv Ay_i - \tilde{\lambda}_i y_i$，利用残量检验其收敛.

4．重启：选择一个新的初始向量，正规化得到新的 υ_1，重新回到步骤 2.

当 $(\tilde{\lambda}_i, y_i)$ 是 A 特征对较佳的逼近时，残差趋于零，但是被逼近的特征对是病态时，小的残差不能保证好的逼近，特别是，实际计算中发现经常会出现 Ritz 值已经收敛，但 Ritz 向量却不收敛，这样残量便不会很小的不规则现象，为了避免以上的问题，对应于 Ritz 值 $\tilde{\lambda}_i$，在 Krylov 子空间中选择一个单位向量 u_i，满足[3]：

$$\left\|\left(A-\tilde{\lambda}_i I\right)u_i\right\| = \min_{u\in K_m,\|u\|=1}\left\|\left(A-\tilde{\lambda}_i I\right)u\right\|, \tag{2.3}$$

称 u_i 为精化向量．这个关系式表明：近似特征对 $\left(\tilde{\lambda}_i, u_i\right)$ 的残量范数达到最小，它是该子空间所能够提供的关于近似特征值对特征向量近似的最佳逼近.

定理 1　设 z_i 是矩阵 $\tilde{T}_m - \tilde{\lambda}_i \tilde{I}$ 的最小奇异值 $\sigma_{\min}\left(\tilde{T}_m - \tilde{\lambda}_i \tilde{I}_m\right)$ 对应的右奇异向量，那么 u_i 满足：

$$\begin{aligned} &u_i = V_m z_i, \\ &\left\|\left(A-\tilde{\lambda}_i I\right)u_i\right\| = \sigma_{\min}\left(\tilde{T}_m - \tilde{\lambda}_i \tilde{I}_m\right), \end{aligned} \tag{2.4}$$

其中，$\tilde{I} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \end{pmatrix}$．详细证明见[3]．该定理说明精化向量是可以廉价和可靠的计算．在算法 1 中的步骤 3，利用定理 1 求出的 u_i 替代 y_i，所导出的方法称为精化 Lanczos 方法[18].

2.3　精化向量张成子空间的 Ritz 值

文献[4]指出，矩阵 A 在投影空间上的 Ritz 值 $\tilde{\lambda}_1,\cdots,\tilde{\lambda}_l$ 是矩阵 A 在相应的 Ritz 向量 $\tilde{\varphi}_1,\cdots,\tilde{\varphi}_l$ 张成子空间 $E_1 = \mathrm{span}\left\{\tilde{\varphi}_1,\cdots,\tilde{\varphi}_l\right\}$ 上的 Ritz 值．若投影子空间中含有所求特征向量的信息越丰富，则该空间上的 Ritz 值对应所求特征值的近似程度越好，利用精化向量 u_i 的优越性，张成子空间 $E_2 = \mathrm{span}\left\{u_1,\cdots,u_l\right\}$，用该子空间的 Ritz 值 $\tilde{\theta}_i$ 作为所求特征值的近似，比 θ_i 更准确[19]．下面讨论 $\tilde{\theta}_i$ 的计算方法：

算法 2． $\tilde{\theta}_i$ 的计算

1．产生 E_2 的一组标准正交基 $\{q_i\}_{i=1}^{l}$，得到列正交阵 $\hat{V}_l=(q_1,q_2,\cdots,q_l)$．

2．形成 $T_{E_2}=\hat{V}_l^T A\hat{V}_l$．

3．计算 T_{E_2} 的全部特征值 $\tilde{\theta}_i$， $i=1,\cdots,l$．

先讨论如何完成第一步，假设 $Z_l=(z_1,\cdots,z_l)$，其中 z_i， $i=1,\cdots,l$ 是(2.4)的右奇异向量，则 $E_2=\mathrm{span}\{V_m z_1,\cdots,V_m z_l\}=\mathrm{span}\{V_m Z_l\}$，如果 $Z_l=W_l R$ 是矩阵 Z_l 的 QR 分解，那么

$$E_2=\mathrm{span}\{V_m Z_l\}=\mathrm{span}\{V_m W_l\}, \tag{2.5}$$

其中 W_l 是 $m\times l$ 标准正交阵，R 是 l 阶可逆的上三角阵．由(2.5)得到具有标准正交列的矩阵 $V_m W_l$ 的列向量组恰为子空间 E_2 的一组标准正交基，因此

$$\hat{V}_l=V_m W_l, \tag{2.6}$$

算法 2 的第二步有：

$$T_{E_2}=(V_m W_l)^T AV_m W_l=W_l^T T_m W_l, \tag{2.7}$$

由此，没有必要显式地形成子空间 E_2 的一组标准正交基，利用已有的 T_m 以及 Z_l 的 QR 分解得到的正交阵便可形成 A 在 E_2 的一组特定标准正交基下的限制矩阵 T_{E_2}．完成第一部分和第二部分总的运算量是 $O(m^2 l)$，并且由于在实际的计算中，需要求的特征对的个数 l 比求解子空间维数 m 小得多，故计算 l 阶矩阵 T_{E_2} 特征值的运算量 $9l^3$ 是可以忽略的，因此使用精化 Ritz 向量张成的子空间上 Ritz 值作近似特征值，增加运算量是可以忽略不计．如果 A 是一个对称矩阵，可以得 T_{E_2} 也是对称矩阵．

定理 2　矩阵 T_{E_2} 的特征值 $\tilde{\theta}_i\ (i=1,\cdots,l)$ 满足

$$\min_{\theta_j}\left|\tilde{\theta}_i-\tilde{\lambda}_j\right|\le C\kappa(U_l),$$

其中 $C=l\max\left\{\sigma_{\min}\left(\tilde{T}_m-\tilde{\lambda}_i\tilde{I}_m\right), j=1,\cdots,l\right\}$， $U_l=(u_1,\cdots,u_l)$ [19]．

该定理表明了矩阵 T_{E_2} 的特征值 $\tilde{\theta}_i$ 和 Ritz 值 $\tilde{\lambda}_i$ 之间的关系，并且说明了 $\tilde{\theta}_i$ 作为所求特征值的近似可能比 $\tilde{\lambda}_i$ 更好．

2.4 精化 Lanczos 压缩重启

使用 Lanczos 算法得到线性方程组 $Ax=b$ 的解，算法可描述如下：选择单位初始向量 x_0，计算 $r_0=b-Ax_0$，$\upsilon_1=\dfrac{r_0}{\|r_0\|}$，则由 m 步 Lanczos 迭代过程得到方程组的第 m 步迭代解为 $x_m=x_0+V_m d$，其中 $T_m d=\|r_0\|e_1$[17].

Lanczos 算法是求解大型对称不定线性方程组的有效方法之一，然而随着 Lanczos 算法所生成 Krylov 子空间维数的增大, Lanczos 向量往往失去正交性，致使 Lanczos 算法的收敛速度可能很慢．实际计算中，重新启动是有必要的，在重启中考虑子空间 $\mathrm{span}\left\{\upsilon_{m+1},A\upsilon_{m+1},A^2\upsilon_{m+1},A^3\upsilon_{m+1},\cdots,A^{m-k-1}\upsilon_{m+1}\right\}$，对该子空间进行压缩，一种典型的压缩是在 Krylov 子空间中添加若干近似特征向量，当 Krylov 子空间进行扩增时,压缩也随之发生[10].文[1]给出了用特征向量来增广 Krylov 子空间的理论基础及数值实验.

求解线性方程组时，近似特征向量被求出并进入下一个循环，压缩能帮助收敛，特别是向 Krylov 子空间中加入一些模接近于零的特征值对应的特征向量能够加快收敛速度，事实上，对于这些模接近于零的特征值对应的特征向量，可以用 Krylov 子空间方法得到，且在新的 Krylov 子空间形成的过程中，近似特征向量的近似度会不断提高，特别在标准 Krylov 子空间方法中，如果因为这些特征向量而减缓了收敛速度，则随着这些特征向量的近似度的提高，用增广 Krylov 空间方法解线性方程组的收敛速度会明显加快[17]. 在该空间添加若干 Ritz 向量或精化向量．增广的子空间增加了内存，但每次迭代减少了运算，避免矩阵乘向量．由式(2.2)可证添加后的子空间仍是 Krylov 子空间．设 m 为子空间的最大维数，k 为重启中添加向量的个数．在新的子空间的前面添加 k 个模最小的 Ritz 向量 $y_1,\cdots,y_k$，令 $Y=\left(y_1,\cdots,y_k\right)$ 则该子空间为[8]：

$$\mathrm{span}\left\{y_1,y_2,\cdots,y_k,\upsilon_{m+1},A\upsilon_{m+1},A^2\upsilon_{m+1},A^3\upsilon_{m+1},\cdots,A^{m-k-1}\upsilon_{m+1}\right\},\tag{2.8}$$

它是 Krylov 子空间，其中 υ_{m+1} 是上一次循环的最后一个基向量.

定理 3 在重启时，使用 Sorensen 方法得到的子空间为：